



TITLE:

Direct numerical simulation of  
charged colloids in an oscillating  
electric field( Abstract\_要旨 )

AUTHOR(S):

Shih, Chun Yu

---

CITATION:

Shih, Chun Yu. Direct numerical simulation of charged colloids in an oscillating electric field. 京都大学, 2015, 博士(工学)

ISSUE DATE:

2015-07-23

URL:

<https://doi.org/10.14989/doctor.k19240>

RIGHT:

京都大学	博士（工学）	氏名	施 俊羽（シ ジュンウ）
論文題目	Direct numerical simulation of charged colloids in an oscillating electric field （振動電場下での荷電コロイド粒子の直接数値シミュレーション）		
<p>（論文内容の要旨）</p> <p>コロイドは、食品や生活用品として広く利用されているだけでなく、紙やパルプの製造や不純物の浄化など工業的なプロセスでも重要な問題であり、その安定性は、構成粒子と分散媒との界面状態に左右される．これまでに様々なアプローチから精力的に研究が行われてきたにもかかわらず、流体力学相互作用と静電相互作用の競合のため、理論的取り扱いが著しく困難なため、荷電コロイド粒子が示す複雑な動的挙動の理解は進んでいない．そこで、コロイド粒子間の流体力学相互作用を正確に取り扱うことが出来る直接数値計算法（Smoothed Profile Method, SP 法）を用いて、荷電コロイド粒子の動的挙動に関して系統的理解を目指した研究を実施した．本論文では特に、コロイド粒子の電気泳動現象に対する外部電場の周波数依存性、ゼータ電位依存性、電気二重層厚さ依存性とイオン拡散係数依存性を明らかにすることを目的とした．本論文は、序論（第1章）と結論（第5章）を含め、全5章で構成されている．</p> <p>第1章は序論であり、既存の研究を概観するとともに、本研究で取り扱う検討内容を明確にし、本論文で用いた直接数値計算法の1つである SP 法の説明を行った．直接数値計算法とは、流体の基礎方程式である連続の式とナビエ・ストークス方程式、分散粒子の運動を記述するニュートン・オイラー方程式を、流体が分散粒子表面での境界条件を正しく満たすように解くシミュレーション法であり、流体と粒子の連成運動を正確に計算することが可能である．この手法の主な困難は、流体の運動を計算機で解くために導入した離散空間（計算格子点）上での流体-粒子境界の取り扱いにあり、シミュレーションの効率と精度は用いる計算モデルに大きく依存する．複数の有力な計算モデルが考案されているが、その中の1つに名嘉山と山本により開発された SP(Smoothed Profile)法がある[Phys. Rev. E 71, 036707 (2005)]．本研究ではこの手法を使用することにより、計算効率と計算精度の両立を実現している．</p> <p>第2章では、荷電コロイド粒子に振動電場をかけて、粒子とイオン分布を考慮した SP 法によるシミュレーションを用い、解析を行った．まず SP 法による電気泳動シミュレーションの妥当性を確認するために、電気泳動度とゼータ電位の関係について O'Brien-White による解析結果と比較した．シミュレーション結果が非常に良く解析結果を再現できることを確認した後に、粒子の移動度に対する外部電場の周波数依存性を明らかにした．粒子周りでの運動量とイオンの拡散に付随する2つの特性周波数との大小関係で定義される3つの周波数領域が存在し、それぞれ異なる周波数依存性が見られることを見いだした．さらに、コロイド分散粒子の体積分率が高いほど電気二重層の重なりが顕著になり、単一粒子周りの電気二重層の分極の影響が、周りの粒子によって低減されることを示した．</p> <p>第3章では、電気二重層の分極による影響を理論的に調べるため、単一荷電コロイド粒子の分極率を定量的に計算した．その結果、分極の強さはゼータ電位、イオンの拡散</p>			

京都大学	博士（工学）	氏名	施 俊羽（シ ジュンウ）
<p>係数，およびの電気二重層の厚さであるデバイ長に影響されること，分極のメカニズムはゼータ電位の強さによって異なることを定量的に示した．</p> <p>電気二重層の分極によってコロイド粒子に双極子が生じ，周囲の粒子との間には異方的な相互作用が生じる．第4章では，この静電相互作用について系統的に調べた．本研究では，最も強い相互作用を生じる双極子の方向に対して粒子対が平行に並んだ場合，及び任意の方向に並んだ場合についてシミュレーションを行い，静電相互作用の強さの外部電場の強度と周波数に対する依存性を明らかにした．さらに，コロイド粒子に生じた双極子により，複数の粒子が直線上に配列する様子をシミュレーションによって明らかにした．</p> <p>最後の第5章は結論であり，第2章から4章までを総括すると共に，今後の研究展開を記した．</p>			

氏 名	シ ジュンウ 施 俊羽
-----	----------------

(論文審査の結果の要旨)

コロイドは食品や生活用品として広く利用されているだけでなく、様々な工業材料の製造プロセスでも重要な系であり、これまでに様々なアプローチから精力的に研究が行われてきた。しかし、荷電コロイド分散系では流体力学相互作用と静電相互作用の競合のために解析的な取り扱いが困難であり、粒子系が示す複雑な静的・動的挙動に対する理論的理解は深まっていない。本論文では、コロイド粒子間の流体力学相互作用を正確に取り扱うことが出来る直接数値計算法である Smoothed Profile (SP)法を用いて、荷電コロイド粒子に対する直接数値シミュレーションを行った。以下にその研究成果の概要を記す。

1) 粒子とイオン分布を考慮した SP 法によるシミュレーションを用い、荷電コロイド粒子に振動電場をかけて、粒子の移動度に対する外部電場の周波数依存性を調べた。その結果、粒子周りでの運動量とイオンの拡散に付随する2つの特性周波数との大小関係で定義される3つの周波数領域が存在し、それぞれ異なる周波数依存性が見られることを明らかにした。さらに、コロイド分散粒子の体積分率が高いほど電気二重層の重なりが顕著になり、単一粒子周りの電気二重層の分極の影響が、周りの粒子によって低減されることを示した。

2) 電気二重層の分極による影響を理論的に調べるため、単一荷電コロイド粒子の分極率を定量的に計算した。その結果、分極の強さはゼータ電位、イオンの拡散係数、およびの電気二重層の厚さであるデバイ長に影響されること、分極のメカニズムはゼータ電位の強さによって異なることを定量的に示した。

3) 電気二重層の分極によってコロイド粒子に双極子が生じ、周囲の粒子との間には異方的な相互作用が生じる。この静電相互作用について系統的に調べた。本研究では、最も強い相互作用を生じる双極子の方向に対して粒子対が平行に並んだ場合に加えて、任意の方向に配列した場合についてもシミュレーションを行い、静電相互作用の強さの外部電場の強度と周波数に対する依存性を明らかにした。

以上、本論文は、新しいシミュレーション手法の構築に加えて、振動電場下での荷電コロイド粒子の挙動に関する新たな知見を多く含んでおり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成26年6月24日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。